



Beynəlxalq Konfrans "Fizika-2005" International Conference "Fizika-2005" Международная Конференция "Fizika-2005"

7 - 9
iyun
June 2005
Июнь

səhifə
№67 page 245-247
стр.

Bakı, Azərbaycan

Baku, Azerbaijan

Баку, Азербайджан

КОНЦЕНТРАЦИОННЫЙ ПРОФИЛЬ МЕЛКИХ АКЦЕПТОРНЫХ ПРИМЕСЕЙ В КРИСТАЛЛАХ Ge-Si, ВЫРАЩЕННЫХ МОДЕРНИЗИРОВАННЫМ МЕТОДОМ БРИДЖМЕНА

АЖДАРОВ Г.Х., ЗАХРАБЕКОВА З.М., КЯЗИМОВА В.К., ГУБАТОВА Л.А.

*Институт Физики НАН Азербайджана,
AZ-1143, Баку, пр. Г. Джавида, 33AZ-1143, Баку-143,
E-mail: zangi@physics.ab.az*

В пфанновском приближении решена задача распределения примесей Al, Ga и In в кристаллах Ge-Si, выращенных модернизированным методом Бриджмена с использованием германиевой затравки и подпитывающего стержня кремния. Показано существенное влияние зависимости коэффициента сегрегации примеси от состава кристалла и изменения объёма расплава, связанного с его подпиткой, на концентрационный профиль примесей вдоль оси кристаллизации сплава.

Актуальность работ направленных на изучение поведения примесных элементов в полупроводниках связана с определяющим влиянием этих элементов на электронные свойства матрицы. Классические полупроводники Si и Ge, легированные различными электроактивными примесями, являются базовыми материалами современной микроэлектронной промышленности. Широко используемыми на практике для легирования этих кристаллов являются элементы III группы периодической системы. Размещаясь в узлах кристаллической решётки матрицы эти элементы ведут себя как акцепторные центры с малой энергией активации. Ионизационный потенциал примесей Al, Ga и In в кремнии составляет 68,5; 72 и 155 мэВ, а в германии 10,8; 10,97 и 11,61 мэВ соответственно [1]. Обладая достаточно большой растворимостью как в кремнии, так и в германии (10^{17} - 10^{20} см⁻³) [2], эти примеси позволяют управлять электрическими свойствами полупроводников в широких пределах как в области низких, так и в области комнатных температур. Одним из важнейших вопросов в исследовании примесных центров в полупроводниках является распределение примеси по длине кристалла, связанное с сегрегацией легирующего элемента. Равновесные коэффициенты сегрегации рассматриваемых примесей при температуре кристаллизации матрицы составляют в кремнии 0,002; 0,008; 0,0004, в германии 0,073; 0,087; 0,001 соответственно для Al, Ga и In [3]. Такие малые значения K приводят к существенному градиенту концентрации индия вдоль оси кристаллизации в слитках Si и Ge, выращенных традиционным методом Бриджмена.

В настоящей работе в пфанновском приближении и в рамках модели виртуального кристалла для твёрдых растворов решена задача распределения примесей Al, Ga и In в кристаллах Ge-Si, выращенных модернизированным методом Бриджмена с использованием германиевой затравки и подпитывающего слитка кремния [4,5]. По этому методу выращивание монокристалла производится в двух режимах. Вначале, после расплавления германиевой загрузки над монокристаллической затравкой, устанавливается фронт кристаллизации. Затем, в расплав германия через его верхнюю поверхность с определённой скоростью вводится часть подпитывающего стержня кремния. В этой стадии рост кристалла происходит в статическом режиме, без включения механизма вытягивания тигля. Постепенное увеличение содержания кремния в расплаве ведёт к концентрационному переохлаждению на фронте кристаллизации и росту монокристалла Ge-Si с переменным составом вдоль оси кристаллизации. Рост концентрации кремния в кристалле и температуры на фронте кристаллизации продолжается до значения, определяемого количеством введённого в расплав подпитывающего слитка. После этого на фронте кристаллизации устанавливается температура, определяемая температурой ликвидуса соответствующего состава системы Ge-Si. На втором этапе включается механизм вытягивания тигля и производится выращивание однородного монокристалла Ge-Si путём поддержания достигнутой температуры на фронте кристаллизации за счёт балансировки состава расплава соответствующим соотношением скорости его кристаллизации и подпитывания. На рис.1

приведены, заимствованные из [4,5], расчётные зависимости концентрации кремния вдоль трёх слитков Ge-Si, выращенных в двух режимах для получения кристаллов с концентрацией кремния в однородной части – 10, 20 и 30 ат.%.

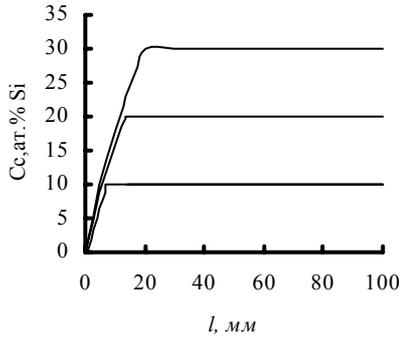


Рис.1. Расчётные зависимости концентрации кремния вдоль трёх слитков Ge-Si, выращенных в двух режимах для получения кристаллов с концентрацией кремния в однородной части – 10, 20 и 30 ат.%.

В расчётах принято, что высота расплава в стартовой позиции равна 100 мм, а градиент температуры в зоне роста буферного кристалла составляет 50⁰С/см. Начальная часть кривых с переменным составом соответствует первому этапу роста кристалла в статическом режиме. Плато, отвечает второму этапу роста кристалла, с заданным однородным составом.

Задачу распределения примесей в кристалле, выращенном этим методом решали при выполнении следующих стандартных условий [2]: фронт кристаллизации плоский; на фронте кристаллизации существует равновесие между твёрдой и жидкой фазами; диффузия примеси и конвекция в расплаве обеспечивают однородность жидкой фазы по всему объёму; диффузия атомов примеси в твёрдой фазе пренебрежимо мала; Отметим, что для системы Ge-Si эти условия выполняются практически при скоростях роста кристалла менее 1х10⁶м/с [2, 6].

Введём следующие обозначения: V_l^0 , V_l – объёмы расплава в тигле в начальный и текущий моменты; V_c , V_{Si} – объёмы кристаллизующегося расплава и растворяющегося кремниевого стержня в единицу времени; C_l^0 , C_l – концентрации примеси в расплаве в начальный и текущий моменты; C_c – концентрация примеси в кристалле; C – общее количество примеси в расплаве; $K = C_c / C_l$ – равновесный коэффициент сегрегации примеси в текущий момент; t – время. С принятыми выше обозначениями на первом этапе роста буферного кристалла с переменным составом в статическом режиме имеем:

$$C_l = \frac{C}{V_l} \quad \text{и}$$

$$\frac{dC_l}{dt} = \frac{\dot{C}V_l - \dot{V}_l C}{V_l^2} = \frac{\dot{C} - \dot{V}_l C_l}{V_l} \quad (1)$$

По условию задачи считаем, что в рассматриваемый период V_c и V_{Si} не зависят от времени. Тогда, учитывая, что $C_c = C_l K$ имеем:

$$V_l = V_l^0 - (V_c - V_{Si})t,$$

$$\dot{V}_l = -V_c + V_{Si} \quad \text{и} \quad \dot{C} = -V_c C_l K \quad (2)$$

В рамках модели виртуального кристалла для твёрдых растворов, считаем, что K зависит от концентрации кремния в кристалле линейно. В соответствии с кривыми рис.1 на первом этапе, в принятом приближении K будет зависеть и от t линейно. Заменяя K в (2) на $K = K_0 - At$, (K_0 – коэффициент сегрегации примеси в чистом германии, A – постоянный множитель) и подставляя его в (1) после несложных преобразований и интегрирования имеем:

$$\ln \frac{C_l}{C_l^0} \left[\frac{V_l^0 - (V_c - V_{Si})t}{V_l^0} \right]^{\frac{(V_c - V_c K_0 - V_{Si})(V_c - V_{Si}) + AV_l^0}{(V_c - V_{Si})^2}} = -\frac{AV_c t}{V_c - V_{Si}} \quad (3)$$

Введя следующие обозначения: $V_{Si}/V_c = \alpha$; $V_c/V_l^0 = \beta$; $V_c t/V_l^0 = \gamma$ из (3) имеем:

$$\ln \frac{C_l}{C_l^0} [1 - \gamma + \alpha\gamma]^{\frac{(1 - K_0 - \alpha)(1 - \alpha) + \frac{A}{\beta}}{1 - 2\alpha + \alpha^2}} = -\frac{A\gamma}{\beta(1 - \alpha)} \quad (4)$$

Преобразуем в (4) член A/β следующим образом:

$$\frac{A}{\beta} = \frac{K_0 - K}{t\beta} = \frac{(K_0 - K)V_c}{V_c t\beta} = \frac{K_0 - K}{\gamma} \quad (5)$$

С учётом (5) и того, что $C_c = C_l K$ из (4) находим:

$$C_c = C_l K = C_l^0 K [1 - \gamma(1 - \alpha)]^{\frac{(1 - K_0 - \alpha)(1 - \alpha)\gamma + (K_0 - K)}{\gamma(1 - \alpha)^2}} \cdot \exp\left(\frac{K_0 - K}{1 - \alpha}\right) \quad (6)$$

Уравнение (6) позволяет определить концентрационный профиль примеси вдоль длины кристалл l путём построения зависимости C_c от $\gamma = V_c t/V_l^0 = l/L$, где L высота расплава в начале кристаллизации. На втором этапе роста кристалла состав твёрдого раствора остаётся неизменным со временем и, следовательно, коэффициент сегрегации рассматриваемой примеси на протяжении всего этапа будет неизменным и равным таковому для соответствующего состава матрицы. Принимая в (6) $K_0 = K$ для этого случая имеем:

$$C_c = C_l K = C_l^0 K [1 - \gamma(1 - \alpha)]^{\frac{(1 - K - \alpha)}{(1 - \alpha)}} \quad (7)$$

Рис.2-4, для примера, демонстрируют концентрационные профили примесей Al, Ga и In вдоль трёх слитков Ge-Si, выращенных в вышеописанных технологических режимах, данные по продольному составу которых представлены на рис.1. Здесь же для, сравнения, приведена эта зависимость

для германия, выращенного традиционным методом Бриджмена.

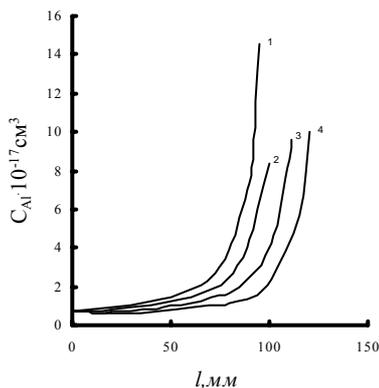


Рис.2. Концентрационные профили примеси Al вдоль кристалла Ge выращенного традиционным методом Бриджмена (кривая 1) и трёх слитков Ge-Si, данные по продольному составу которых представлены на рис.2. Кривые 2,3 и 4 относятся соответственно к кристаллам с однородной частью 10; 20 и 30 ат.% Si

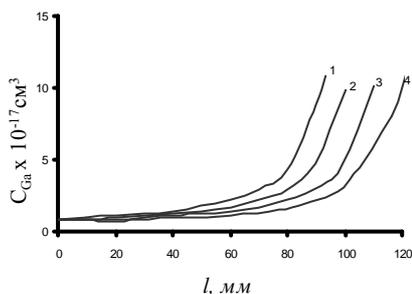


Рис.3. Концентрационные профили примеси Ga вдоль кристалла Ge выращенного традиционным методом Бриджмена (кривая 1) и трёх слитков Ge-Si, данные по продольному составу которых представлены на рис.2. Кривые 2,3 и 4 относятся соответственно к кристаллам с однородной частью 10; 20 и 30 ат.% Si

В расчётах заложены следующие исходные данные и технологические параметры: $C_l^0 = 1 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$; $L = 100 \text{ мм}$; $K = K_0 - x(K_0 - K_l)$, здесь K_l - коэффициент сегрегации данной примеси в кремнии; длина буферного кристалла $l_B = 6,6; 13,2 \text{ и } 20 \text{ мм}$ в слитках, с однородной частью 10; 20 и 30 ат.% Si соответственно; $\alpha = 0,345; 0,385 \text{ и } 0,435$ в зоне буферного кристалла и $0,247; 0,167 \text{ и } 0,087$ в

однородной части слитков с композицией 10, 20 и 30 ат. % Si соответственно. Отметим, что значения l_B определяются заданным градиентом температуры, диаграммой состояния системы Ge-Si и требуемой композицией в однородной части кристалла. Значения α вычислялись по данным работы [5].

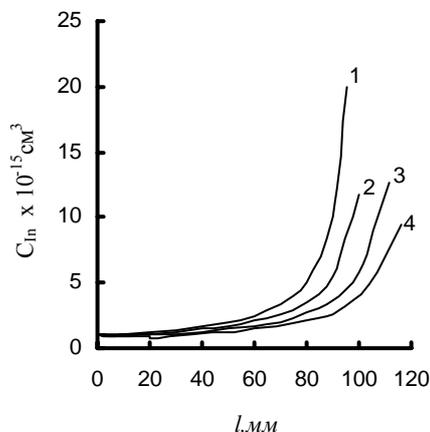


Рис. 4. Концентрационные профили примеси In вдоль кристалла Ge, выращенного традиционным методом Бриджмена (кривая 1) и трёх слитков Ge-Si, данные по продольному составу которых представлены на рис. 2. Кривые 2,3 и 4 относятся соответственно к кристаллам с однородной частью 10; 20 и 30 ат.% Si.

Как видно из рис.2-4, скорость роста концентрации по длине кристалла для всех примесей существенно уменьшается с увеличением содержания кремния в матрице и это особенно сказывается в конечной части слитков. Такое поведение объясняется с одной стороны уменьшением коэффициента сегрегации примесей с ростом концентрации кремния в расплаве, с другой увеличением объёма расплава, обусловленным его подпитыванием кремнием. На основе вышеизложенного материала, можно сделать следующее заключение. В кристаллах твёрдых растворов Ge-Si, выращенных модернизированным методом Бриджмена, с использованием германиевой затравки и подпитывающего кремниевого стержня, на скорость изменения концентрации примесей вдоль оси кристаллизации существенно влияет зависимость коэффициента сегрегации примеси от состава Ge-Si и изменение объёма расплава, связанное с его подпиткой. Учёт этих факторов является необходимым условием при решении вопросов, связанных с выращиванием кристаллов с заданным концентрационным профилем примесей в кристаллах системы Ge-Si.

[1]. Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос, Электронные свойства легированных полупроводников, М.: Наука, (1979) 416.
 [2]. В.М. Глазов, В.С. Земсков, Физико-химические основы легирования полупроводников, М.: Наука, (1967) 371.
 [3]. A. Barz, P. Dold, U. Kerat, S. Recha, and K.W. Benz, Journal of Vac. Sci. Technol. B 16(3) (1998) 1627.
 [4]. Г.Х. Аждаров, Известия ВУЗов России, Материалы электронной техники, 2 (2004) 47.
 [5]. Г.Х. Аждаров, Р.З. Кязимзаде, Тезисы док. Национальной конференции по росту кристаллов, Москва (2004) 109.
 [6]. G.Kh. Azhdarov, T. Kucukomerogly, A. Varilci, M. Altunbas, A. Kobya, P. G. Azhdarov. Journal of Crystal Growth, 226 (2001) 437.

